Université Mohammed V- Agdal
Département de Physique

Année universitaire 06-07

Examen de Mécanique Quantique
SM- SMI 3

I- 10 points

B- A la date t=0, on considère un paquet d'onde $\psi(x,0)$ à une dimension, de position moyenne x_0 et d'impulsion moyenne p_0, défini par :

$$\psi(x,0) = e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}} f(x - x_0) \quad \textbf{avec } \mathbf{f(x)} = \mathbf{C}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

La transformée de Fourier de la fonction f(x) a pour expression:

$$\text{T.F.}(f(x)) = \tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} f(x)\, dx \; = \mathbf{C}\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}}\mathbf{e}^{-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2}}$$

1- Déterminer l'expression de $\tilde{\psi}(p,0)=\text{TF}(\psi(x,0))$

2- Si l'écart quadratique moyen Δx_0 est tel que: $\Delta x_0 = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$, Que vaut alors la valeur limite de l'écart quadratique moyen Δp_0.

3- Le paquet d'onde évolue librement. On note $H = \frac{p^2}{2m}$ l'hamiltonien du système.

Montrer que la $\text{T.F.}(\psi(x,t)) = \tilde{\psi}(p,t) = e^{-i\frac{H(p)}{\hbar}t}\, \tilde{\psi}(p,0)$

4- L'approximation, à l'ordre 1 en p, de H nous donne:

$$H(p) \approx H(p_0) + (p - p_0)\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{p=p_0} \qquad \text{On posera : } p_0 = mv \text{ et } E = \frac{1}{2}mv^2$$

Déterminer l'expression de $\psi(x,t)$
Interpréter physiquement le résultat obtenu.

TSVP

II- 10 points

A- On considère le potentiel défini par V(x) tel que :

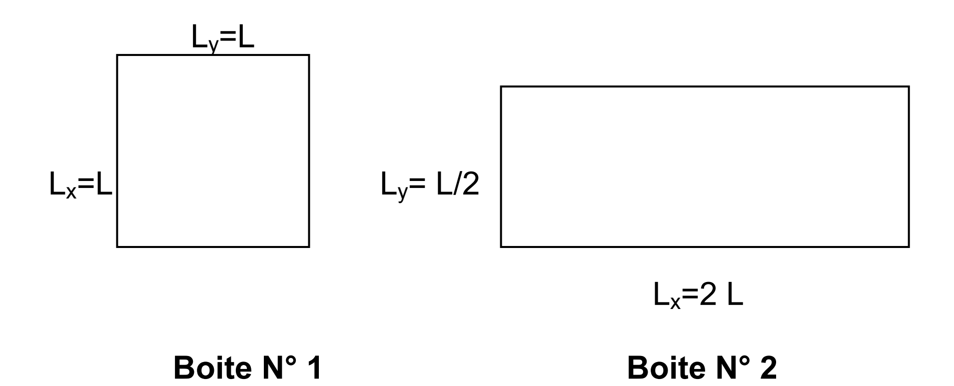
$$V(x)=\begin{cases}+\infty & \textbf{pour } \mathbf{x}<0\\ 0 & \textbf{pour } \mathbf{0}<\mathbf{x}<L_x\\ +\infty & \textbf{pour } \mathbf{x}>L_x\end{cases}$$

1- Résoudre l'équation de Schrödinger dans les différentes zones.

2- Montrer que l'énergie est quantifiée et déterminer son expression E_{n_x}

On normalisera les fonctions d'ondes à l'unité.

B- On considère deux boites quantiques bidimensionnelles comme le montre la figure ci-dessous. Chacune d'elle contient un électron.



Boite N° 1 **Boite N° 2**

1- Déterminer l'expression de l'énergie E_{n_x,n_y} pour chacune des deux boites en utilisant les résultats de la partie A.

2- Laquelle des deux boites correspond à l'état fondamental de plus basse énergie ? Y'a-t-il des niveaux dégénérés ? Justifier votre réponse

3- Déterminer les énergies des deux premiers états excités pour chacune des boites. Laquelle des deux boites correspond au premier état excité de plus basse énergie? Justifier votre réponse

4- Si la longueur d'onde du photon émis quand l'électron passe de l'état excité à l'état fondamental dans la boite 1 est égale à 650 nm, quelle est la longueur d'onde du photon émis quand l'électron passe de l'état excité à l'état fondamental dans la boite 2 ?
A quel domaine de rayonnement électromagnétique appartient-elle ?

Université Mohammed V- Agdal **Année universitaire 06-07**
Département de Physique
M. ABD-LEFDIL

Corrigé de l'examen de mécanique quantique
SM- SMI 3

I-

1- La transformée de Fourier de $\psi(x,0)$ est donnée par :

$$T.F.(\psi(x,0)) = \tilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,\psi(x,0)\,dx \;=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{(p-p_0)x}{\hbar}}\,f(x-x_0)\,dx$$

Posons: $x - x_0 = x'$, on obtient alors:

$$\tilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{(p-p_0)(x'+x_0)}{\hbar}}\,f(x')\,dx'$$

$$\tilde{\psi}(p,0) = e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{(p-p_0)x'}{\hbar}}\,f(x')\,dx'$$

$$\tilde{\psi}(p,0) = e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar}}\,\tilde{f}(p-p_0)$$

$$\tilde{\psi}(p,0) = e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar}}\,C\frac{\sigma}{\sqrt{2}}\,e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\hbar^2}\sigma^2}$$

2- On a $\Delta x_0 \Delta p_0 \geq \frac{\hbar}{2}$: la relation d'incertitude d'Heisenberg.

Comme l'écart quadratique sur la position à l'instant t=0 est $\Delta x_0 = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$, l'écart quadratique sur l'impulsion à l'instant t=0 Δp_0 aura pour valeur limite: $\Delta p_0 = \frac{\hbar}{2\Delta x_0} = \frac{\hbar}{\sigma\sqrt{2}}$

3- Avec la notation de Dirac, L'équation de Schrödinger est donnée par :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

Dans la représentation $\{|p\rangle\}$, elle s'écrira :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle p|\psi\rangle = \langle p|\hat{H}|\psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(p,t)}{\partial t} = H(p)\langle p|\psi\rangle \quad \text{avec } H(p) = \frac{p^2}{2m}$$

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(p,t)}{\partial t} = H(p)\,\tilde{\psi}(p,t)$$

$$\frac{\partial\tilde{\psi}(p,0)}{\tilde{\psi}(p,0)} = \frac{-i}{\hbar}H(p)\partial t \Leftrightarrow \tilde{\psi}(p,t) = A\,\mathbf{e}^{-i\frac{H(p)}{\hbar}t}$$

à t=0, $\tilde{\psi}(p,0) = A$: $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p,0)\,\mathbf{e}^{-i\frac{H(p)}{\hbar}t}$

4- L'expression de $\psi(x,0)$ est déterminée à partir de la transformée de Fourier inverse, soit :

$$\psi(x,t) = T.F.^{-1}\left(\tilde{\psi}(p,t)\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}}\,\tilde{\psi}(p,t)\,dp$$

Compte tenu de $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p,0)\,\mathbf{e}^{-i\frac{H(p)}{\hbar}t}$, alors: $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}}\,\tilde{\psi}(p,0)\,\mathbf{e}^{-i\frac{H(p)}{\hbar}t}\,dp$

Or $H(p) \approx H(p_0) + (p - p_0)(\frac{\partial H}{\partial p})_{p=p_0} = \frac{p_0^2}{2m} + (p - p_0)\frac{p_0}{m} = -\frac{p_0^2}{2m} + p\frac{p_0}{m} = -\frac{p_0^2}{2m} + pv = -E + pv$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}}\,\tilde{\psi}(p,0)\,\mathbf{e}^{-i\frac{(-E+vp)}{\hbar}t}\,dp$$

$$\psi(x,t) = \mathbf{e}^{+i\frac{E}{\hbar}t}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x}{\hbar}p}\,\tilde{\psi}(p,0)\,\mathbf{e}^{-i\frac{vt}{\hbar}p}\,dp$$

$$\psi(x,t) = \mathbf{e}^{+i\frac{E}{\hbar}t}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(x-vt)}{\hbar}p}\,\tilde{\psi}(p,0)\,dp$$

$$\psi(x,t) = \mathbf{e}^{+i\frac{E}{\hbar}t}\,\psi(x - vt,0)$$

On note que la densité de probabilité reste inchangée : $|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x - vt,0)|^2$

C'est la même allure pour les deux courbes $|\psi(x,0)|^2$ et $|\psi(x,t)|^2$ avec un changement du centre de la gaussienne.

II-

1- La résolution de l'équation de Schrödinger dans la zone où le potentiel est nul donne :

On a : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} = \mathbf{E}\phi(x)$

$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Ailleurs, la fonction d'onde est nulle.
Relations de continuité :

$\phi(0) = A + B = 0 \Leftrightarrow A = -B$ et $\phi(L_x) = A\left(e^{ikL_x} - e^{-ikL_x}\right) = 0 \Leftrightarrow kL_x = n_x\pi$ avec n_x un entier.

$\phi(x)$ est normalisée à l'unité: $\int_0^{L_x} |\phi(x)|^2 dx = 1$

On en déduit: $\phi(x) = \phi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)$

2- On a $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $k = \frac{n_x\pi}{L_x}$. Par conséquent : $E = E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}n_x^2$ avec n_x un entier.

On voit que l'énergie est quantifiée.

B-

1- Par analogie avec **la partie A**, on peut écrire directement pour le cas bidimensionnel:

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

Boite n°1: $L_x = L_y = L$: $E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right)$

Université Mohammed V- Agdal **Année universitaire 06-07**
Département de Physique
M. ABD-LEFDIL

Boite n°2 : L_x=2L et L_y=L/2 : $E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{n_x^2}{4} + 4n_y^2\right)$

2- Etat fondamental (n_x=n_y=1) dans la boite n°1 : $E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 2$

- Etat fondamental (n_x=n_y=1) dans la boite n°2 : $E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{1}{4} + 4\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 4{,}25$

On voit que c'est l'état fondamental de la boite n°1 qui correspond à la plus faible énergie.

3- Etats excités
Pour la boite n°1:

1er état excité (n_x=1 et n_y=2 ou n_x=2 et n_y=1): $E_{1,2} = E_{2,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 5$

C'est donc un niveau doublement dégénéré.

2èmeétat excité (n_x=2 et n_y=2): $E_{2,2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ \mathbf{8}$

Pour la boite n°2:

1er état excité (n_x=2 et n_y=1): $E_{2,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{4}{4} + 4\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 5$

$$E_{1,2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{1}{4} + 16\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 16{,}25 > E_{2,1}$$

2èmeétat excité (n_x=3 et n_y=1): $E_{3,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} 6{,}25$

Remarque: $E_{1,3} > E_{2,2} > E_{3,1}$

On note que :
L'énergie du premier état excité dans la boite n°1 est égale à celui de la boite n°2.

4- $\hbar\omega = \frac{hC}{\lambda} = E_{initiale} - E_{finale}$

a- Quand on passe du premier état excité à l'état fondamental :

Dans la boite n°1 : $E_i - E_f = \frac{hC}{\lambda_1} = E_{1,2} - E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ (5-2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 3$

Dans la boite n°2 : $E_i - E_f = \frac{hC}{\lambda_2} = E_{2,1} - E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ (5-4{,}25) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ 0{,}75$

On voit que $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 4 \Leftrightarrow \lambda_2 = 4\lambda_1$ **A.N. :** $\lambda_2 = 2600\ \mathbf{nm} = \mathbf{2{,}6}\ \mu\mathbf{m}$

C'est un rayonnement infrarouge.

b- Quand on passe du deuxième état excité à l'état fondamental :

Dans la boite n°1 : $E_i - E_f = \frac{hC}{\lambda_1} = E_{2,2} - E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ (\mathbf{8-2}) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ \mathbf{6}$

Université Mohammed V- Agdal **Année universitaire 06-07**
Département de Physique
M. ABD-LEFDIL

Dans la boite n°2 : $E_i - E_f = \frac{hC}{\lambda_2} = E_{3,1} - E_{1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,\mathbf{(6,25 - 4,25)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\ \mathbf{2}$

On voit que $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{6}{2} \Leftrightarrow \lambda_2 = 3\lambda_1$ **A.N. :** $\lambda_2 = 1950\ \mathbf{nm} = \mathbf{1,95\ \mu m}$

C'est un rayonnement infrarouge, plus énergétique que le précédent.